



TITLE:

6.中性子散乱で観測される液体金属の動的構造:その理論的展望(液体金属の構造および物性に関するシンポジウム,研究会報告)

AUTHOR(S):

小幡, 行雄

CITATION:

小幡, 行雄. 6.中性子散乱で観測される液体金属の動的構造:その理論的展望(液体金属の構造および物性に関するシンポジウム,研究会報告). 物性研究 1972, 17(4): 293-296

ISSUE DATE:

1972-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88394>

RIGHT:

$$S_{22}(0) = x_{Q=0}^{22} = Z/B$$

$$S_{12}(0) = x_{Q=0}^{12} = \sqrt{Z/B} \quad (2)$$

$$\text{ここで } B = Z/U_2 + 1 + 8\eta \frac{(1+\eta k)}{(-\eta)^2} - \frac{4\pi(n_1 r_c^3)}{3} \beta A$$

電子の self-energy を 0 とすると、圧縮率をきめる B の第一項は $\frac{2}{3} \frac{Z E_F}{k_B T}$ となり、Bohm-Staver の結果を与える。 B で与えられる圧縮率は、電子の self-energy, hard-sphere の寄与をとり入れた圧縮率を与えている。

6. 中性子散乱で観測される液体金属の動的構造

— その理論的展望 —

日本原子力研究所 小幡 行雄

以前に古典液体による中性子散乱の問題点について review した¹⁾ことがあるが、今回はその折にふれなかったこと、および最近の発展と問題点について概説しよう。

§ 1. 固体と液体との相違

中性子散乱で見ているのは時間にして $\sim 10^{-13}$ 秒、空間にして $\sim 1 \text{ \AA}$ 位の間の変動である。低温の固体のモデルとして Debye モデルをとれば、動的構造因子 $S(Q, \omega)$ は干渉性散乱、非干渉性散乱とも液体のそれとは定性的にもことなる²⁾。しかし非調和項を考慮すれば両者の差は固体の温度を上げるにつれて減少する。このことは有限個の原子の集りとして固体の格子力学を計算機で扱った例³⁾でも示され、また隔点直下の Al の単および多結晶、直上の液体 Al の中性子散乱の実験⁴⁾でも多結晶と液体による散乱スペクトルの強い類似性によ

り実証されている。

§ 2. 計算機シミュレーション

非干渉性散乱の動的構造因子を $S_s(Q, \omega)$ とすれば

$$\lim_{Q \rightarrow 0} \left[\frac{\omega^2 S_s(Q, \omega)}{Q^2} \right] = \frac{kT}{2M} f(\omega)$$

から一般化された振動数分布 $f(\omega)$ およびそのフーリエ変換としての速度自己相関関数 $\phi(t)$ が求まる筈だが外挿の精度の問題もあって実際に理論の当否を検討するもとになっているのは有名な Rahman の計算機実験の結果である⁵⁾。記憶函数法—森の連分数法の一応用例—によりこれを理論的に求める試みについては既に述べたが¹⁾、ポテンシャルとして Lennard—Jones 型（希ガス液体）と Friedel 型（液体金属）をとり計算機により $f(\omega)$ および $\phi(t)$ を求め、液体金属と中性液体の差をだしたのは D. Schiff⁶⁾である。今後この方面の発展により中性液体と液体金属の相違点がより明かにされることを期待したい。

§ 3. Zero Sound Approach (Dielectric Response Approach)

液体のような disordered system でも固体の phonon に似た “ collective mode ” が観測されることが報じられて以来、とくに最近 3～4 年間に多くの理論的試みがなされた。連分数の方法によるもの⁷⁾、quasi—crystalline model 的な試み⁸⁾によるものもあるが、多くは一見違っていても、“ Zero Sound Approach ” という大枠の下に概括できる⁹⁾。すなわち、密度のゆらぎに対する generalized susceptibility を $\chi(Q, \omega)$ とすれば—これと $S(Q, \omega)$ との関係は古典近似では $S(Q, \omega) = -\frac{kT}{\pi} \frac{\text{Im } \chi(Q, \omega)}{\omega}$ となるが—

$$\chi(Q, \omega) = \frac{\chi_{sc}(Q, \omega)}{1 - \psi(Q) \chi_{sc}(Q, \omega)}$$

と「分子場近似」理論で書かれる。ここで $\psi(Q)$ は原子間の「有効ポテンシ

「 $\chi_{sc}(Q, \omega)$ 」はある self-consistent な susceptibility である。

$\psi(Q)$ と $\chi_{sc}(Q, \omega)$ のいろいろなとり方は表 1 に示す。この表でモーメントとはそれぞれの理論で正しく与えられる $S(Q, \omega)$ のモーメントの次数を示す。

この表に示した多くのものは古典近似であるが、量子論的に formulate することも可能であり、また液体金属を電子とイオンの二成分系として扱う試みも行われ始めている。 16) 17)

表 1 各種の Zero Sound Approach の比較

文 献	$\psi(Q)$	$\chi_{sc}(Q, \omega)$	モーメント
RPA	$v(Q)^*)$	ideal gas	2
10), 11)	$-\beta^{-1}c(Q)^{**})$	同 上	0.2
12)	$-\beta^{-1}c(Q)$	self motion	0.2
13)	$g(r)$ の functional	同 上	2
14)	$g(r)$ の functional $\{\langle \omega^4 \rangle\}$	同 上	2.4
15)	$\langle \omega^2 \rangle, \langle \omega^4 \rangle$ より	ideal gas +Gaussian damping	0, 2, 4

*) $v(Q)$ なまの原子間ポテンシャル

**) $c(Q)$ direct correlation function のフーリエ変換

文 献

1) 小幡行雄：古典液体による中性子散乱の問題点

第二回中性子非弾性散乱研究会（於原研）レポート

JAERI Report No. 1157 (68) 114

2) M.Lomer : Contemporary Physics 1 (66) 278

3) J.M.Dickey and A.Pashkin : Phys.Rev. 188 (69) 1407

- 4) K.E.Larsson et al: " Inelastic Scattering of Neutrons " vol 2
p.117(IAEA , 1965)
- 5) A.Rahman: Phys. Rev. 136 (64) A405
- 6) Daniel Schiff : Phys. Rev. 186 (69) 151
- 7) V.F.Sears : Canad. J.Phys. 47 (69) 199 , 48(70) 616
C.Murase : J.phys. Soc. Japan 29 (70) 549
- 8) S.Takeno and M.Goda : Prog. Theor. Phys. 45 (71) 331.
- 9) M.Nelkin : AERE-R 6277 (1969)(unpublished)
- 10) M.Nelkin and S.Ranganathan : Phys. Rev. 164 (67) 222
- 11) J.Chihara : Prog. Theor. Phys. 41 (69) 285
- 12) W.C.Kerr:Phys.Rev. 174 (68) 316
- 13) K.S.Singwi. K.Skold and M.P.Tosi : Phys. Rev. Letters
21 (68) 881
- 14) J.Hubbard and J.L.Beeby : J.Phys. C. 2 (69) 556
- 15) K.N.Pathak and K.S.Singwi : Phys. Rev. A 2 (70) 2427
- 16) H.Takahashi : Physica 51 (71) 333
- 17) J.Chihara : to be published in Prog , Theor.Phys.